

## «Методы математического моделирования динамики наносистем».

### А) Краткая аннотация учебного курса «Методы математического моделирования динамики наносистем».

Учебный курс «Методы математического моделирования динамики наносистем» предназначен для краткосрочного повышения квалификации преподавателей и научных работников высшей школы по направлению «Функциональные наноматериалы для космической техники». Цель: изучение современных методов и вычислительных алгоритмов, применяемых для моделирования динамических процессов в наносистемах

*Целью данного курса* является изучение и освоение современных математических методов и вычислительных алгоритмов, применяемых для моделирования динамики нанообъектов и связанных с ними неравновесных процессов и явлений, а также овладение слушателями навыками проведения вычислительного эксперимента

Необходимой базой для успешного усвоения материала курса является знание основ теоретической физики, высшей математики (линейная алгебра и математический анализ, теория обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных), а также численных методов и компьютерных технологий.

#### **Перечень лабораторных работ (12 ч)**

**Лабораторная работа 1.** Математическое моделирование кинетики кластеризации в переохлажденном расплаве (4 ч, темы 1,2).

**Лабораторная работа 2.** Математическое моделирование нестационарных процессов транспортно-диффузионного переноса. (4 ч, тема 2).

**Лабораторная работа 3.** Математическое моделирование кластерной динамики методом дискретных элементов (4 ч, тема 3).

### Б) Требования к уровню освоения учебного курса

Преподаватели и научные работники должны:

- Знать:
  - область применения физических принципов, которые могут быть положены в основу создания новых наноматериалов;
- Иметь навыки:
  - сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в предметной области, включать приобретенные знания в уже имеющуюся систему знаний и применять эти знания в самостоятельных методических разработках;
  - переносить полученные знания о смежные предметные области и к использованию этих знаний для построения междисциплинарных методических разработок.
- Иметь представление:

- о теоретических основах воздействия лазерного излучения на вещество с различными физическими свойствами.
- о методах моделирования пучка лазерного излучения
- о методах моделирования воздействия лазерного излучения на среды различной физической природы

## **В) Реферативное содержание лекций дистанционной (теоретической) части учебного курса:**

### **Лекция 1. Математические модели динамики наносистем.**

Многоуровневое описание физико-химических систем. Представление динамики наносистем континуальными и дискретно-элементными моделями.

Математические модели кинетики кластеризации и роста кластеров в неравновесных условиях. Функция распределения кластеров по размерам. Система уравнений кинетики неравновесной кластеризации. Преобразование к транспортно-диффузионному уравнению в пространстве размеров. Рост кластеров в свободном объеме. Нуклеация и рост кластеров в нанопорах вещества и на поверхности.

Математические модели транспортно - диффузионного переноса. Механизмы переноса и трансформации вещества и энергии в системе. Особенности процессов в неэкстенсивных системах. Дробно-дифференциальное исчисление как аппарат описания процессов переноса в сложно-структурированных средах.

Методы математического описания динамики взаимодействующих частиц. Квантово-механическое и классическое описание. Функция распределения частиц в фазовом пространстве. Уравнение Лиувилля для многочастичной функции распределения. Цепочка Боголюбова. Уравнение Больцмана. Интеграл столкновений. Уравнение Власова для бесстолкновительной среды. Учет межчастичного взаимодействия в виде транспортно-диффузионного переноса в пространстве скоростей. Уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова и его соответствие системе стохастических дифференциальных уравнений Ито (Ланжевена).

### **Лекция 2. Методы решения задач транспортно-диффузионного переноса.**

Построение моделей переноса на основе законов сохранения. Транспортно-диффузионный перенос в фазовом пространстве. Уравнение переноса в интегральной и дифференциальной формах. Основные слагаемые уравнения - нестационарное, транспортное, диффузионное и источниковое. Постановка начальных и граничных условий. Аппроксимация дифференциальных уравнений. Метод контрольного объема. Свойство консервативности разностной схемы. Проблемы численной диффузии и численной дисперсии. Первое дифференциальное приближение разностной схемы. Свойство монотонности разностной схемы. Методы монотонизации. TVD – схемы. Расщепление по координатам и по физическим процессам. Численные методы решения дробно-дифференциальных уравнений.

### **Лекция 3. Методы дискретных элементов в задачах математического моделирования динамики наносистем .**

Методы моделирования динамики систем взаимодействующих частиц (дискретных элементов). Методы молекулярной динамики. Потенциалы взаимодействия. Потенциалы Леннарда-Джонса, Бэкингэма. Электростатический потенциал. Потенциалы для металлов. Потенциалы для элементов подгруппы углерода. Радиус усечения. Вычисление макроскопических параметров. Осреднение по ансамблю и по времени. Эргодичность. Вычислительные алгоритмы реализации дискретно-элементных методов. Общая схема вычислительного процесса. Разностные схемы интегрирования уравнений динамики дискретных элементов. Расчет правых частей. Выбор шага по времени. Условия устойчивости и достижения необходимой точности. Задание начального состояния. Кинетические методы Монте-Карло. Пробные и полевые частицы. Розыгрыш столкновений. Схема мажорантной частоты. Численные методы решения стохастических дифференциальных уравнений.